14. ランダム系の量子状態と拡散(基研短期研究会報告「非可積分系の量子力学」,研究会報告)

合田, 正毅

しているエネルギー・レベルでパラメータCの変化に対して avoided crossingを呈している場合の正準相関を計算したものである。avoided crossing を呈している場所で正準相関は飛びがあり，avoided crossing の前後で量子状態は単なる交換でないことを示唆している。

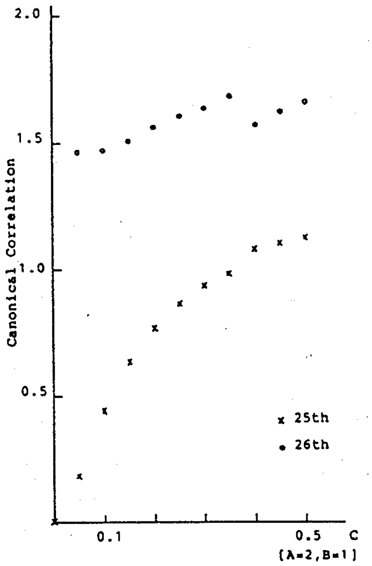

図2　Avoided crossing 前後での隣接するレベルの正準相関

参考文献

1) S. DeWitt & N. Graham (eds) *The Many World Interpretation of Quantum Mechanics,* Princeton Univ. Press, 1973.

14.　ランダム系の量子状態と拡散

新潟大・工　合 田 正 毅

ランダム系の量子拡散の理論的研究は P. W. Anderson[1] に始まり約30年の歴史を持ち量子拡散の有無に関しては正確な議論が成されているので，量子カオスとの関係を求めて，それらを簡単に紹介した。

簡単のため強結合近似での一電子系

$$H=\sum_{l}|l>\varepsilon_{l}<l|+\sum_{l\neq l'}|l>t_{l,l'}<l'|$$

を考える。ここに対角項 $\{\varepsilon_l\}$，非対角項 $\{t_{l,l'}\}$ は一般に確率変数とする。従ってハミルトニアンの集合に対して確率1で成り立つ性質が問題となる。時刻 $t=0$ で $a_n(0)=\delta_{n,0}$ なる初期条件を与え波束の運動 $\phi(t)=\sum_n a_n(t)|n>$ を考え $P_n(t)=|a_n(t)|^2$ とするとき，確率1で $P_0^\infty\equiv\lim_{t\to\infty}P_0(t)>0$ かどうかを問題とし，P_0^∞が正なら拡散不在と定義する[1]。$P_0^\infty=0$ の場合でも $P_0(t)$ が充分ゆっくり減衰すれば $\int_0^\infty P_0(t)\,\mathrm{d}t=\infty$ が確率1で起り得る。これを弱拡散不在と定義する[2]。

有限系を考えると $G(E)=(E-H)^{-1}$ で定義されるグリーン関数は複素エネルギー(E)面の実軸上に一次の極を持ち従って点スペクトラムを持つ。系を無限大にするとスペクトラムは次の3っつの場合に分かれる。[3]

1. 純枠点スペクトラム。　典型的な例は固有関数が指数関数的に局在しているケースで，1, 2次元ランダム系及び3次元ランダム系の一部に見出される。拡散不在でありエネルギー固有値間の反発はきわめて弱い。波束の運動は可算個の固有関数で記述されるので，量子カオスから一番遠いように思われる。
2. 特異連続スペクトラム。　典型的な例はスペクトラムがカントール集合になっている場合で概周期系の一部，[4] 特に準結晶等に於て見出されている。弱拡散不在であり固有値間の反発は弱い。波束の運動は連続無限個の関数で記述され，フィボナッチ系では個々の関数は内部構造を持った複雑なものである。
3. 絶対連続スペクトラム。　3次元ランダム系でランダムネスが弱い時に見出される。その中に $P_0(t)\propto 1/t^{\beta}\ (\beta>1)$ で（従って充分速く拡散し）連続無限個の関数により記述される波束の振舞が充分複雑である領域の存在が期待される。レベル間の反発は強い。

以上ポテンシャル散乱による一粒子ランダム系について触れ，まとめを以下の表にした。点線及び？ははっきりしていないことを表わす。

1) P. W. Anderson: Phys. Rev. **109** (1958) 1492.

2) K. Ishii: Prog. Theor. Phys. Suppl. **53** (1973) 77.

3) M. Reed and B. Simon: Method of Modern Mathematical Physics **1** (Academic Press, 1972).

4) B. Simon: Adv. Appl. Phys. **3** (1982) 463.

5) M. Kohmoto: 日本物理学会誌　**42**　(1987)　433.

6) S. Kotani: Proc. Taniguchi Symp. SA Katata (1982) Ed. by K. Ito, (Kinokuniya, 1984) 225.
S. Kotani: Commun. Math. Phys. **97** (1985) 443.
S. Kotani: Contemporary Math. **41** (1985) 267.
S. Kotani: Proc. Taniguchi Symp. SA Katata (1985) Ed. by K. Ito and N. Ikeda, (Kinokuniya, 1986) 219.

Hilbert Space $H = H_{PP} \oplus H_{SP} \oplus H_{AC}$	$H_{PP} \subset \ell^2(L^2)$	$H_{SC} \oplus H_{AC} \not\subset \ell^2(L^2)$		
Spectrum	Pure Point	Singular Continuous (Cantor Set)	Absolute Continuous (Cantor Set?)	
Type of Hilbert space (Eigenfunctions)	Exponential, power	power	(power?)	
Type of Diffusion	Absence of Diffusion	Slow Diffusion Long Time Tail		Strong Diffusion
Imaginary Part of the Green Function[2]	$\lim_{\gamma \to 0_+} \mathrm{Im}\, G_{nn}(E + i\gamma) = 0$, A.E.E		$\lim_{\gamma \to 0_+} \mathrm{Im}\, G_{nn}(E + i\gamma) = -\Pi \frac{d\, I_n(E)}{d E} < 0$	
1-Dimension Lyapunov Exponent[6]	$\gamma > 0$		$\gamma = 0$	

15. 分子の動力学とカオス

東大・教養　加　藤　重　樹

化学反応の速度論は遷移状態理論を基礎として発達してきた。化学反応は一般に反応物から生成物への分子の構造変化をあらわす曲線座標（反応座標）とその曲線に沿って定義され局所的にそれに直交する振動，回転座標を用いて記述することができるが，遷移状態理論とは遷移状態点と呼ばれる反応座標上の特定の点（近似的にはポテンシャルエネルギー面の鞍点がとられることが多い）において可能な量子状態が等しく実現されることを仮定することにより反応速度を求める理論である。この遷移状態理論は従来２分子反応に適用されてきたが，１つの分子が分解したり他の分子に異性化する単分子反応では遷移状態の仮定と共にエネルギー乱雑化の仮定，すなわち反応分子の中であらゆる可能な量子状態が反応の起こる時間のスケールよりも短い時間内で実現されてしまうという仮定が導入され従来の実験事実の説明に成功を収めてきた。このように反応速度論は本来動的過程である化学反応の動力学に統計的仮定を導入することにより簡単な描像を与えてきたが，近年，レーザーや分子線など新しい実験手段が化学反応の研究に用いられ上述の反応についての統計的仮定の妥当性が議論の対象になってきた。